6-2 Lippmann-Schwinger 方程式

Lippmann-Schwinger 方程式

↑

Schrödinger 方程式を書き直した

(散乱問題に適応するため)

- Schrödinger 方程式：

$$(\hat{H}_0 + V)|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2$$

自由粒子：

$$\hat{H}_0|\phi\rangle = E|\phi\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$|\phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

(散乱問題では $V=1$ ととる)

• Schrödinger方程式の書き直し,

$$(E - \hat{H}_0)|\psi\rangle = V|\psi\rangle$$

ここで $(E - \hat{H}_0)^{-1}$ を左からオペレートすると

$$\therefore \boxed{|\psi\rangle = \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} V|\psi\rangle}$$

となる. ここで $\boxed{+i\varepsilon}$ は分母がゼロになる事をふせぐため

↓

【詳細はあとで議論する】

これに自由粒子の解を足す. よって

$$\boxed{|\psi\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} V|\psi\rangle}$$

Lippmann-Schwinger 方程式

という

【Lippmann Schwinger 方程式の解法】

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \int d^3r' \langle \mathbf{r} | \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} | \mathbf{r}' \rangle V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}') d^3r'$$

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv \langle \mathbf{r} | \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} | \mathbf{r}' \rangle$$

$$= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \langle \mathbf{r} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i\varepsilon} | \mathbf{p} \rangle \langle \mathbf{p} | \mathbf{r}' \rangle$$

$$\therefore \boxed{G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{p}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \frac{1}{E - \frac{\hat{p}^2}{2m} + i\varepsilon}}$$

今 $\underline{E = \frac{k^2}{2m}}$ より

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{2m}{(2\pi)^3} \int d^3p \frac{e^{i\mathbf{p}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{k^2 - p^2 + i\varepsilon}$$

・ $\int e^{i\mathbf{p}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} d\Omega_p$ の計算：

$$\begin{cases} d^3p = p^2 dp\, d\Omega_p \\ d\Omega_p = \sin\theta_p\, d\theta_p\, d\varphi_p \end{cases}$$

$t = \cos\theta_p$ とおくと $dt = -\sin\theta_p\, d\theta_p$

よって

$$\int e^{ip|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|t} \sin\theta_p\, d_p\, d\varphi_p$$

$$= 2\pi \int_{-1}^{1} dt\; e^{ip|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|t}$$

$$= \frac{2\pi}{ip|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\left(e^{ip|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} - e^{-ip|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\right)$$

$$= \frac{4\pi}{p|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\sin\left(p|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|\right)$$

よって

$$G(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \frac{2m}{(2\pi)^3}\frac{4\pi}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\frac{(-)}{2}\,\mathrm{Im}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{ip|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{p^2-k^2-i\varepsilon}\,p\,dp$$

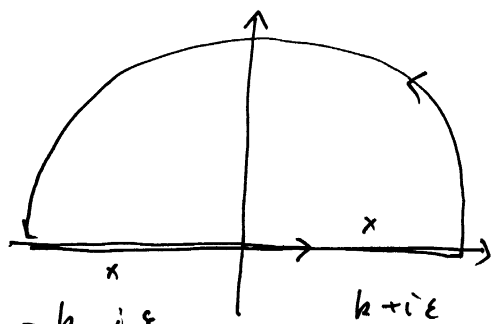
$$= -\frac{m}{2\pi^2|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\,\mathrm{Im}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{ip|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{p^2-k^2-i\varepsilon}\,p\,dp$$

ここで

$$p^2-k^2-i\varepsilon \fallingdotseq (p-k-i\varepsilon)(p+k+i\varepsilon)$$

を用いる.

複素平面での積分は



p

より

$$G(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \frac{-m}{2\pi^2|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \,\mathrm{I_m}\, \frac{1}{2k} e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \; 2\pi i\, k$$

$$\therefore \boxed{G(\mathbf{r},\mathbf{r}') = -\frac{m}{2\pi}\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}$$

となる.

$r\to\infty$ では

$$\underbrace{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \simeq r - \frac{(\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}')}{r}}$$

だから

$$\boxed{G(\mathbf{r},\mathbf{r}') = -\frac{m}{2\pi r} e^{ikr} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'}} \quad (\mathbf{k}' \equiv k\hat{\mathbf{r}})$$

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \int G(\mathbf{r},\mathbf{r}')\, V(\mathbf{r}')\, \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')\, d^3r'$$

$$G(\mathbf{r},\mathbf{r}') \simeq -\frac{m}{2\pi r}\, e^{ikr}\, e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'}$$ より

$$\boxed{\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) - \frac{m}{2\pi}\frac{e^{ikr}}{r}\int e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'}\, V(\mathbf{r}')\, \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')\, d^3r'}$$

ここで

$$\underline{\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}}$$ なので

$$\Downarrow$$

$$\boxed{f(\mathbf{k},\mathbf{k}') \equiv f(\theta) = -\frac{m}{2\pi}\int e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'}\, V(\mathbf{r}')\, \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')\, d^3r'}$$

と求まる.